

5. П.А.М. Дирак Принципы квантовой механики. –М.: Наука. Гл. Ред. Физ.-мат. Лит. 1979 – 480 с.; P.A.M. Dirac The Principles of Quantum Mechanics. Oxford. 1958.
6. Vysikaylo Ph.I. Cumulative Quantum Mechanics (CQM). Part I: Prerequisites and Fundamentals of CQM// Surface Engineering and Applied Electrochemistry 2012. V. 48 N. 4. pp. 293-305.
7. Vysikaylo Ph.I. Cumulative Quantum Mechanics (CQM) Part II. Application of Cumulative Quantum Mechanics in Describing the Vysikaylo Polarization Quantum\_Size Effects// Surface Engineering and Applied Electrochemistry, 2012, Vol. 48, No. 5, pp. 395–411.
8. Высикайло Ф.И. Поляризация аллотропных полых форм углерода и её применение в конструировании нанокompозитов // Нанотехника. 2011, 1(25), с. 19–36.
9. Jaffke T., Illenbergen E., Lezius M., Matejczik S., Smith D. and Mark T.D. Formation of C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> by Free Electron Capture. Activation Energy and Effect of the Internal Energy on Lifetime// Chem. Phys. Lett., 1994, 226, pp. 213-218.
10. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. Т.9 Статистическая физика Ч. 2. Теория конденсированного состояния. 4е изд. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. – 496 с.
11. Collins A.T., Lightowers E.C. and Dean P.J. Role of Phonons in the Oscillatory Photoconductivity Spectrum of Semiconducting Diamond// Phys. Review 1969. V. 183, № 3, pp. 725-730.
12. Collins A.T. and Williams A. W. S. The nature of the acceptor centre in semiconducting diamond // J. Phys. C: Solid State Phys. (1971) № 4, pp. 1789-1800.
13. Denisov V.N., Mavrin B.N., Polyakov S.N., Kuznetsov M.S., Terentiev S.A., Blank V.D. First observation of electronic structure of the even parity boron acceptor states in diamond. // Physics Letters A (2012) V. 376, pp. 2812–2815.
14. Wright G.B., Mooradian A. Raman scattering from donor and acceptor impurities in silicon. // Phys. Rev. Lett (1967) V. 18, № 15, pp. 608-610.
15. Jain K., Lai S., Klein M.V. Electronic Raman scattering and the metal-insulator transition in doped silicon. // Physical Review B (1976) V. 13, № 12, pp. 5448-5464.
16. Высикайло Ф.И. Самоорганизующиеся кумулятивно-диссипативные наноструктуры в легированных кристаллах. Парадоксы в квантовой механике и их решение на базе кумулятивной квантовой механики. // Инженерная физика. 2013, №3, с. 15-48.

**ANALYTICAL DESCRIPTION OF THE EMISSION SPECTRA  
OF STANDING LARGE-RADIUS EXCITONS IN CRYSTALS  
OF GROUP IV ELEMENTS, BORON-DOPED**

**Ph. Vysikaylo**

*Moscow Radio Engineering Institute (Moscow)  
Technological Institute for Superhard and Novel Carbon Materials  
(Troitsk, Moscow)*

*Abstract.* The author formulated the principles of the cumulative quantum mechanics (CQM). CQM describes: 1) unlimited cumulation of symmetric  $\psi_{n-1/2}$ -electron function of the de Broglie waves (with a spectrum  $E_{n-1/2} \sim \pm (n-1/2)^{\pm 2}$ ) captured potentials in spherical and cylindrical hollow cavities, 2) the polarization quantum-dimensional effects, 3) the

Vysikaylo's split of the quantum level with principal quantum number  $n$  into two sublevels (with  $\psi_n$  and with  $\psi_{n-1/2}$ ) with the splitting energy  $\Delta E_{n-1/2,n} \sim n^{-1/4}$  in the case of the barrier, and with  $\Delta E_{n-1/2,n} = 13.56 \cdot (n^{-1/4}) / (\epsilon(n-1/2)n)^2$  [eV] for the potential well with  $U(r) \sim 1/\epsilon r$ ; and 4) spectra of the transitions between states with different symmetry of  $\psi$ -functions ( $\psi_n \rightarrow \psi_{n-1/2}$ ) in the superlattices of standing excitons in IV group crystals, B-doped.

*Keywords:* cumulative quantum mechanics, quantum resonator, hollow fullerene molecule, polarization quantum size effects, symmetric and asymmetric  $\psi$ -function, the level splitting in two.

УДК 537.9+539.6

## МНОГОЧАСТИЧНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ФИЗИКЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Э.В. Геворкян

Московский государственный областной университет  
105005, Москва, ул. Радио, 10а

*Аннотация.* Показано, что многочастичные взаимодействия необходимо учитывать при описании физических свойств и фазовых превращений в конденсированных системах. Модель парного взаимодействия пригодна лишь для качественных оценок свойств реальных систем. Обсуждается концепция эффективных парных взаимодействий и методы их вычисления.

*Ключевые слова:* конденсированное состояние, многочастичные взаимодействия, жидкости, кристаллы, жидкие кристаллы, фазовые переходы.

Многочастичные взаимодействия играют важную роль в статистической физике конденсированного состояния. Если в газах они могут считаться малым «возмущением» (поправкой, уточняющей модель парного взаимодействия) которое следует учитывать только в исключительных случаях, например, для объяснения эффектов неаддитивности энергии и третьих вириальных коэффициентов, то в конденсированных системах это уже не так ([1]). Эффекты неаддитивности также важны при описании взаимодействия атомов или молекул с макроскопическими телами или между двумя телами. Многочастичный неаддитивный вклад в энергию вандерваальсова взаимодействия составляет более 20%.

Наиболее дальнотействующие из таких взаимодействий для простых структурных элементов (атомов) трехчастичные дисперсионные диполь-диполь-дипольные взаимодействия Аксильрода-Теллера (третий порядок теории возмущений)

$$\Phi_3^{\text{АЭНТ}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = C^{(3)} \frac{1 + c_1 c_2 c_3}{r_{12} r_{23} r_{31}}, \quad (1)$$

где  $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  - расстояние между «частицами» (атомами), а  $c_k = \cos \theta_k$  - косинусы внутренних углов треугольника, образованного этими тремя атомами. Трехчастичная дисперсионная постоянная в формуле (1) определяется интегралом по частоте  $\omega$  от произведения трех динамических дипольных поляризуемостей  $\alpha_k(i\omega)$ , а при использовании потенциала (1) в качестве модельного (полуфеноменологического) калибруется по экспериментальным данным.

В плотных конденсированных системах, пожалуй, более существенными являются короткодействующие многочастичные обменные силы первого порядка. Причем для их расчета на самых близких расстояниях обычно вместо теории возмущений используется вариационный метод. Трехчастичный потенциал таких взаимодействий можно удовлетворительно аппроксимировать модельной формулой

$$\Phi_3^{i\dot{a}i}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = A(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \exp\{-\{r_{12} + r_{23} + r_{31}\}/a\}, \quad (2)$$

где  $A(\dots)$  - знакопеременный геометрический фактор,  $a$  - характерный размер структурного элемента.

Учет трехчастичных взаимодействий (1) заметно улучшает согласие результатов теории простых жидкостей с экспериментом. С помощью короткодействующих трехчастичных взаимодействий (2) разрешается ряд парадоксов, связанных со статической и динамической сжимаемостью, и с соотношениями Коши между упругими постоянными кристаллов, а также удается объяснить наблюдаемую структуру кристаллов [2]. Многочастичный вклад в энергию связи даже в простых молекулярных и ионных кристаллах составляет около 10%. В кристаллах других типов, а также в кластерах этот вклад существенно больше. Причем, в конкуренции возможных структур важна не столько величина вклада в полную энергию, сколько его чувствительность к изменению структуры. (Разность энергий зачастую составляет доли процента.) А в этом плане многочастичные взаимодействия существенно превосходят парные.

Для сложных молекул мезогенных органических веществ вклад многочастичных взаимодействий в полную энергию и, вообще, в физические свойства также уже не следует рассматривать как малую поправку или уточнение описания, включающего только парное межмолекулярное взаимодействие. Для объяснения структуры и сложной фазовой диаграммы жидких кристаллов, образованных такими молекулами, структурные элементы принимаются в виде анизометричных твердых ядер. При таком выборе учет внутримолекулярной структуры приводит к анизотропным многочастичным взаимодействиям.

Таким образом, наиболее характерными свойствами многочастичных взаимодействий являются их относительное короткодействие и резкая зависимость от расположения и ориентации «соседей». Поэтому они вместе с парным отталкиванием «твердых ядер» ответственны за формирование структуры ближнего порядка. В самом общем случае, многочастичные взаимодействия между структурными элементами являются следствием подвижной внутрен-

ней структуры этих элементов и появляются после исключения соответствующих «внутренних переменных».

При использовании упрощенной модели парного межмолекулярного взаимодействия потенциалы таких взаимодействий следует считать эффективными. То есть полагать, что они косвенным неявным образом включают в себя многочастичные взаимодействия. Однако этот подход трудно реализовать последовательно.

Рассмотрим статистический вариационный принцип для систем с трансляционными  $\mathbf{r}_k$  и внутренними (ориентационными  $\Omega_k$ , конформационными  $\zeta_k$  и т.д.) степенями свободы,

$$F[\Phi_2, \Phi_3, \dots, \Phi_s] \leq F_i[\Phi_2^{y\delta\delta}; \Phi_2, \Phi_3, \dots, \Phi_s] = F[\Phi_2^{y\delta\delta}] + \langle U_N - U_{i\delta\delta}^{y\delta\delta} \rangle_{y\delta\delta}, \quad (3)$$

где  $\mathbf{k}=(\mathbf{r}_k, \Omega_k, \zeta_k)$ , а угловые скобки обозначают усреднение по аппроксимирующему распределению Гиббса  $\rho_N^{\text{эфф}}$  с эффективным парным взаимодействием (4)

$$U_{i\delta\delta}^{y\delta\delta} = \sum_{i < j} \Phi_2^{y\delta\delta}(\mathbf{i}, \mathbf{j}), \quad (4)$$

$$U_N = \sum_{p=2}^s \frac{1}{p!} \sum_{i_1 \neq \dots \neq i_p} \Phi_p(\mathbf{i}_1, \dots, \mathbf{i}_p). \quad (5)$$

Найдем минимум функционала (3) модельной энергии Гельмгольца  $F_M[\dots]$ , приравнявая нулю его вариацию (6),

$$\langle U_N - U_{i\delta\delta}^{y\delta\delta} | \delta \Phi_2^{y\delta\delta}(\mathbf{i}, \mathbf{j}) \rangle_{y\delta\delta} = 0, \quad (6)$$

где  $\langle a|b \rangle = \langle ab \rangle - \langle a \rangle \langle b \rangle$  - второй семиинвариант (кумулянт) распределения.

Отсюда находим уравнения, определяющие эффективные потенциалы парных межмолекулярных взаимодействий  $\Phi_2^{\text{эфф}}(\dots)$ , которые наилучшим образом учитывают истинные многочастичные взаимодействия  $\Phi_p(\dots)$

$$\Phi_2^{y\delta\delta}(\mathbf{i}, \mathbf{j}) = \Phi_2(\mathbf{i}, \mathbf{j}) + \frac{1}{\rho_2^{y\delta\delta}(\mathbf{i}, \mathbf{j})} \sum_{p=3}^s \frac{1}{(p-2)!} \sum_{i \neq j \neq i_3 \neq \dots \neq i_p} \int \Phi_p(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{i}_3, \dots, \mathbf{i}_p) \rho_p^{y\delta\delta}(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{i}_3, \dots, \mathbf{i}_p) d\mathbf{i}_3 \dots d\mathbf{i}_p, \quad (7)$$

В соответствии с выражением (7) эффективные потенциалы парных межмолекулярных взаимодействий, в отличие от истинных, зависят от термодинамических параметров состояния и от условий молекулярного окружения. Возникающие при этом принципиальные трудности очевидны. Даже при использовании модельных парных потенциалов, при их калибровке нам придется допустить их зависимость от температуры и структуры ближнего порядка. Например, они могут скачком изменяться при фазовых переходах!

Все это радикальным образом меняет привычную схему построения молекулярно-статистической теории конденсированного состояния. Поэтому во многих случаях удобнее, да и более последовательно, работать с многочастичными потенциалами (5), вводя их в явном виде, чем с эффективными парными.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Базаров, И.П.* Статистическая физика жидких кристаллов/ И.П. Базаров, Э.В. Геворкян. - М., изд. Моск. ун-та, 1992. - 496 с.
2. *Базаров, И.П.* Статистическая теория твердых и жидких кристаллов/ И.П. Базаров, Э.В. Геворкян. - М., изд. Моск. ун-та, 1983. - 496 с.

#### MANY-PARTICLE INTERACTIONS IN CONDENSED STATE PHYSICS

**E.V. Gevorkyan**

*Moscow State Regional University  
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

*Abstract.* It is shown that many-particle interactions should be taken into account to describe physical properties and phase transitions in condensed systems. The model of effective pair interactions is suitable only for qualitative estimation of real systems properties. The concept of effective pair interactions and ways to calculate them are discussed.

*Keywords:* condensed state, many-particle interactions, liquids, crystals, liquid crystals, phase transitions.

УДК:530.1:539.12

#### ДВУХШАГОВЫЙ МУЛЬТИБОЗОННЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ ДИСКРЕТНОЙ $U(1)$ МОДЕЛИ ФЕРМИОНОВ

**Н.В. Зверев**

*Московский государственный областной университет  
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

*Аннотация.* Рассмотрен статистический двухшаговый мультибозонный алгоритм вычислений применительно к  $U(1)$  модели фермионов на четырёхмерной решётке пространства-времени. Показано, что использование второго шага принятия-отвержения полей приводит к увеличению производительности алгоритма.

*Ключевые слова:*  $U(1)$  модели, фермионы, алгоритмы, метод Монте-Карло, решётка пространства-времени.